Modélisation non locale à gradients d'endommagement nodal GVNO

Résumé

On présente ici la modélisation non locale à gradient d'endommagement nodal intitulée GVNO dans Code_Aster, issue des travaux de thèse de J. Beaurain. Cette modélisation peut être vue comme une simplification de la modélisation non locale à gradient de variable interne GRAD_VARI.

Les modélisations non locales de type GVNO sont disponibles en 3D (3D_GVNO), axisymétrique (AXIS_GVNO) et déformations planes (D_PLAN_GVNO).

L'utilisation de GVNO est très simple, puisqu'il suffit de préciser la modélisation X_GVNO dans AFFE_MODELE, de préciser une longueur caractéristique sous le mot-clé NON_LOCAL dans DEFI_MATERIAU, et de vérifier que la loi de comportement qu'on souhaite utiliser est bien disponible en version non locale.

On présente l'écriture et le traitement numérique de ce modèle.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Table des matières

1 Rappel sur la théorie des modèles à gradient....3
1.1 Construction des modèles à gradient....3
1.2 Discrétisation en temps....4
1.3 Discrétisation spatiale par éléments finis....4
1.4 Calcul des forces internes....5
2 Choix des éléments finis....6
3 Méthodes de résolution....7
4 Modélisations disponibles....8
5 Lois de comportement disponibles avec les modélisations GVNO....8
6 Conseils/Procédure pour la mise en oeuvre d'une nouvelle loi de comportement à gradients d'endommagement....9
7 Conseils sur l'utilisation de GVNO....9
8 Fonctionnalités et vérifications....9
9 Bibliographie....9
10 Description des versions du document....9

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

1 Rappel sur la théorie des modèles à gradient

Les modèles à gradient présentés ici ont été développés par E. Lorentz [bib1] afin de pouvoir décrire le comportement de matériaux sollicités par de forts gradients des champs mécaniques qui apparaissent dans les zones endommagées ou bien au voisinage de singularités géométriques. En effet, dans le cas de forts gradients, le comportement d'un point matériel n'est plus indépendant de son entourage mais dépend du comportement de son voisinage, d'où l'introduction de gradients dans les modèles.
D'un point de vue numérique, le calcul d'une structure avec une loi d'endommagement locale classique montre que la zone endommagée se localise toujours sur une seule couche d'éléments finis et donc que la réponse de la structure dépend du maillage adopté : les modèles à gradient pallient ce problème.
Dans ce qui suit, nous faisons un bref rappel de cette théorie.

1.1 Construction des modèles à gradient

Cette formulation est restreinte aux matériaux standards généralisés (cf. [Bib 2]).

Les modèles à gradient de variables internes consistent à introduire le gradient de variables internes dans une formulation standard généralisée (cf. [Bib 2]).
Soit a une variable interne et A sa force thermodynamique associée, et soit $\Delta(\dot{a})$ le potentiel de dissipation. Si l'on considère que Δ dépend aussi du gradient de $\dot{a}$, $\Delta=\Delta(\dot{a},\nabla\dot{a})$, on ne sait alors pas écrire localement le principe de normalité :
$A\in\partial\Delta(\dot{a},\nabla\dot{a})$

En effet, une telle écriture nécessiterait l'introduction de 2 variables localement indépendantes a et a_∇, auxquelles on associerait 2 forces thermodynamiques $A=-\frac{\partial\Phi}{\partial a}$, $A_\nabla=-\frac{\partial\Phi}{\partial a_\nabla}$ telles que :
$(A,A_\nabla)\in\partial\Delta(\dot{a},\dot{a}_\nabla)$

Si on appelle F le seuil d'élasticité associé au potentiel $\Delta(\dot{a},\dot{a}_\nabla)$, l'équation précédente est équivalente à :

$$\Delta(\dot{a},\dot{a}_\nabla)=\underset{(A,A_\nabla)\ /\ F(A,A_\nabla)\leq 0}{Sup}\left[\dot{a}\ A+\dot{a}_\nabla A_\nabla\right]$$

Et on a :
$\dot{a}=\dot{\lambda}\frac{\partial F}{\partial A}$, $\dot{a}_\nabla=\dot{\lambda}\frac{\partial F}{\partial A_\nabla}$

Le problème ici est que les variables ne sont pas indépendantes et sont liées par la contrainte non locale $a_\nabla=\nabla a$ si bien qu'on n'est pas sûr de vérifier :
$\dot{a}_\nabla=\dot{\lambda}\frac{\partial F}{\partial A_\nabla}=\nabla\dot{a}$

On propose alors d'oublier l'hypothèse d'écoulement normal en chaque point de la structure tout en conservant le formalisme des matériaux standards généralisés mais à l'échelle de la structure, où les variables d'état sont maintenant le champ de déformation $\boldsymbol{\varepsilon}$ et le champ de variables internes a.
On définit ainsi l'énergie libre globale et le potentiel de dissipation global :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$F_\Phi(\boldsymbol{\varepsilon}, a) = \int_\Omega \Phi(\boldsymbol{\varepsilon}(x), a(x), \nabla a(x)) dx$$
$$D(\dot{a}) = \int_\Omega \Delta(\dot{a}(x), \nabla \dot{a}(x)) dx$$

Le potentiel de dissipation global D est maintenant une fonction du champ $\dot{a}$, et l'écriture $A \in \partial D(\dot{a})$ reprend un sens.

La relation de comportement généralisée s'écrit maintenant :

$$\sigma = \frac{\partial F_\Phi}{\partial \varepsilon}, \quad A = -\frac{\partial F_\Phi}{\partial a}, \quad A \in \partial D(\dot{a})$$

1.2 Discrétisation en temps

On supposera dans toute la suite que l'énergie du modèle régularisée est la somme de l'énergie du modèle local et d'un terme supplémentaire ne dépendant que du gradient de la variable interne qu'on régularise :

$$F_\Phi(\boldsymbol{\varepsilon}, a) = \int_\Omega \Phi^{loc}(\boldsymbol{\varepsilon}(x), a(x)) + \Phi^{grad}(\nabla a(x)) dx$$

Cette séparation correspond aux cas que nous traitons dans Code_Aster, mais il est possible de construire des modèles à gradient qui ne correspondent pas à ce cas. Contrairement à ce qui est fait pour la modélisation GRAD_VARI (modélisation non locale à gradient de variables internes), également disponible dans le code, on considère que l'endommagement aux points de Gauss est l'interpolation de l'endommagement aux noeuds. On évite ainsi de se ramener à une formulation mixte.

En s'appuyant sur l'hypothèse de convexité par rapport à (u, α) du potentiel F_Φ et en adoptant un schéma d'Euler implicite, la résolution des équations d'équilibre se ramène à un problème de minimisation portant sur les incréments $(\Delta u, \Delta \alpha)$. Le problème discrétisé s'écrit alors :

$$\min_{\Delta u} \min_{\Delta \alpha} \left(F_\Phi(\boldsymbol{\varepsilon}^- + \Delta \boldsymbol{\varepsilon}, \alpha^- + \Delta \alpha) - W^{ext} \right)$$

où W^{ext} représente le travail des forces mécaniques extérieures.

1.3 Discrétisation spatiale par éléments finis

Pour résoudre le problème de recherche d'extrema, on effectue une discrétisation spatiale par éléments finis des grandeurs suivantes :

Déplacement : $\boldsymbol{\varepsilon}(x) = \sum_{k \ noeuds} B_{k^u}(x)\, u_k$

Endommagement régularisé : $\alpha(x) = \sum_{k \ noeuds} N_{k^\alpha}(x)\, \alpha_k$.

Le gradient s'exprime alors grâce au gradient des fonctions de forme : $\nabla \alpha(x) = \sum_{k \ noeuds} \nabla N_{k^\alpha}(x) \alpha_k$

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

où $N_{k\alpha}$ sont les fonctions de formes associées au nœud k pour le champ α, B_{ku} sont les fonctions de forme des déformations calculées à partir des dérivées des fonctions de forme associées aux déplacements du nœud k. On différencie les fonctions de forme selon le champ dans la mesure où le degré d'interpolation utilisé peut être différent selon la grandeur considérée.

Dans le modèle éléments finis avec intégration aux points de Gauss, l'intégrale sur le volume de la structure est évaluée par sommation sur les points de Gauss. L'énergie F_Φ s'écrit donc pour le problème spatialement discrétisé :

$$F_\Phi(\boldsymbol{\varepsilon}, \alpha) = \sum_g \omega_g \underbrace{\left[\Phi^{loc}(\boldsymbol{\varepsilon}_g, \alpha_g) + \Phi^{grad}((\nabla\alpha)_g)\right]}_{\Phi_g^{nonlocal}(\boldsymbol{\varepsilon}_g, \alpha_g)}$$

où ω_g correspond au poids des points de Gauss, et l'indice g indique que le champ est évalué aux points de Gauss à partir des valeurs aux nœuds :

$$\varepsilon_g = \sum_{k \text{ noeuds}} B_k^u(x_g) u_k$$

$$\alpha_g = \sum_{k \text{ noeuds}} N_{k\alpha}(x_g)\, \alpha_k$$

$$(\nabla\alpha)_g = \sum_{k \text{ noeuds}} \nabla N_{k\alpha}(x_g)\, \alpha_k$$

1.4 Calcul des forces internes

L'équation d'équilibre mécanique ainsi que l'équation de régularisation sont résolues aux nœuds par recherche d'extremum locaux :

$$\min_{\Delta u} \min_{\Delta\alpha} \left(F_\Phi(\varepsilon^- + \Delta\varepsilon, \alpha^- + \Delta\alpha) - W^{ext} \right)$$

On ne résout pas localement la loi de comportement, comme cela se fait avec la modélisation en gradient de variables internes. Le critère admet désormais une résolution nodale. Les objets avec lesquels on travaille sont l'état d'équilibre et le critère de la formulation choisie définis par les dérivées premières de l'énergie par rapport aux déplacements et à l'endommagement.

Pour plus de simplicité, nous laissons de côté les forces mécaniques extérieures qui sont traitées à part dans Code_Aster. Les forces internes associées aux variables nodales du nœud n (u_n, α_n) ont pour expressions :

$$F^u|_n = \frac{\partial F_\Phi}{\partial u_n} = \sum_g \omega_g \frac{\partial \Phi^{loc}}{\partial u_n} = \sum_g \omega_g \frac{\partial \Phi^{loc}}{\partial \varepsilon_g} : \frac{\partial \varepsilon_g}{\partial u_n} = \underbrace{\sum_g \omega_g \sigma_g : B_n^u}_{\int_\Omega B^T \sigma \, d\Omega}$$

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$F^{\alpha}|_n = \frac{\partial F_{\Phi}}{\partial \alpha_n} = \sum_g \omega_g \left[\frac{\partial \Phi^{grad}}{\partial (\nabla \alpha)_g} (\nabla N)^{\alpha}_n + \frac{\partial \Phi^{loc}}{\partial \alpha_g} N^{\alpha}_n \right]$$

La matrice tangente s'écrit de la façon suivante :

$$K = \begin{pmatrix} \frac{\partial F^u}{\partial u} & \frac{\partial F^u}{\partial \alpha} \\ \frac{\partial F^{\alpha}}{\partial u} & \frac{\partial F^{\alpha}}{\partial \alpha} \end{pmatrix}$$

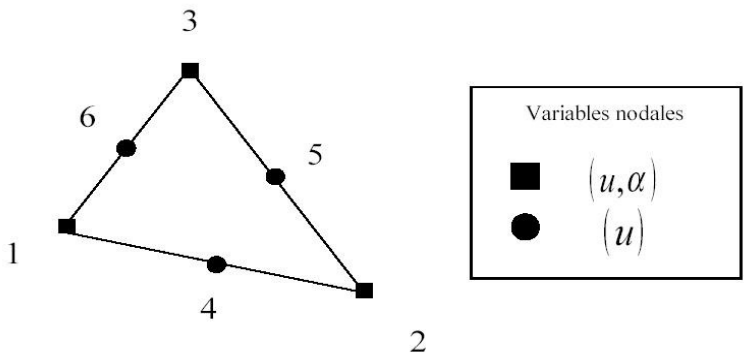
Le cadre des matériaux standards généralisés dans lequel s'inscrit notre modélisation assure la symétrie de la matrice tangente. Il suffit donc de calculer la matrice triangulaire inférieure :

$$\frac{\partial F^u|_n}{\partial u_m} = \sum_g \omega_g B^u_m : \frac{\partial \sigma_g}{\partial \varepsilon_g} : B^u_n$$
$$\frac{\partial F^u|_n}{\partial \alpha_m} = \sum_g \omega_g N^{\alpha}_m \frac{\partial \sigma_g}{\partial \alpha_g} B^u_n$$
$$\frac{\partial F^{\alpha}|_n}{\partial \alpha_m} = \sum_g \omega_g \left[(\nabla N)^{\alpha}_m \frac{\partial^2 \Phi^{grad}}{\partial^2 (\nabla \alpha)_g} (\nabla N)^{\alpha}_n + N^{\alpha}_m \frac{\partial^2 \Phi^{loc}}{\partial^2 \alpha_g} N^{\alpha}_n \right]$$

2 Choix des éléments finis

On se trouve en présence de deux inconnues nodales : les déplacements u et l'endommagement α .

On considère des fonctions de formes P^2 pour u et P^1 pour α .
Les éléments quadratiques, TRIA6 et QUAD8 pour le 2D, TETRA10, PENTA15 et HEXA20 pour le 3D, ont été développés. Les composantes du déplacement sont affectées à tous les nœuds de l'élément alors que les composantes d'endommagement ne sont affectées qu'aux nœuds sommets. Pour plus de clarté, l'élément TRIA6 est représenté ci-dessous :



Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

On utilise les familles de points de Gauss des éléments linéaires correspondants, ce qui se traduit par une sous-intégration sur les déplacements. L'utilisation des familles de points de Gauss des éléments quadratiques impliquerait une sur-intégration pour α provoquant des oscillations intempestives.

3 Méthodes de résolution

Si l'on exclut la condition unilatérale d'irréversibilité de l'endommagement, l'algorithme de Newton tel qu'il est programmé actuellement dans le code suffit à la résolution. Dans notre cas, on doit tenir compte de la dégradation du matériau. Concernant la modélisation GRAD_VARI, cette contrainte est gérée localement, en chaque point de Gauss, par projection sur l'ancienne valeur s'il s'agit d'un comportement de décharge. La résolution du critère n'étant plus locale avec GVNO, il n'est plus possible d'effectuer ce type de projection et on doit imposer l'irréversibilité au niveau global.

Deux méthodes de résolution peuvent alors être envisagées avec cette modélisation. Il est soit possible de travailler avec un Newton classique, en assurant la projection des incréments d'endommagement négatifs. Soit avec un algorithme « sécante » qui consiste à mettre à 0 les blocs extra-diagonaux et donc à considérer les variables de déplacement et d'endommagement indépendantes. Ce qui est équivalent à l'algorithme de minimisation alternée dans le cas de lois de comportement quadratiques en déplacement et en endommagement. On assure cette fois l'irréversibilité par projection des incréments d'endommagement négatifs.

Dans les deux cas, la résolution s'effectue en trois étapes :

1) On s'intéresse dans un premier temps aux incréments d'endommagement à chaque itération. Lorsque l'incrément est négatif, on le projette à 0, de sorte à respecter l'irréversibilité.
2) On construit la matrice de rigidité (seulement les blocs diagonaux dans le cas de la sécante) et les forces internes.
3) On défini les résidus d'endommagement par la relation de complémentarité :

$$R_n^{\alpha} = F^{\alpha}|_n \Delta \alpha_n$$

Avec respectivement : $F^{\alpha}|_n \geq 0$ et $\Delta \alpha_n \geq 0$

Cela implique de regarder le signe des forces internes associés aux degrés de liberté d'endommagement projetés à l'étape 1. En effet, si celui ci est négatif on ne respecte pas l'ensemble des conditions imposées et l'on doit garder la force interne comme résidu. Si celui ci est positif le résidu est alors nul puisque l'incrément est nul.

Plus précisément, la méthode de résolution, dans le cas de la sécante (matrice diagonale par blocs), peut se présenter de la façon suivante :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Itération n :

$\mathbf{u}^-, \boldsymbol{\alpha}^-, \Delta\mathbf{u}^{\mathbf{n}}, \Delta\boldsymbol{\alpha}^{\mathbf{n}}, \mathbf{Vect} = \mathbf{0}$ (vecteur indicateur)

CALCUL DE LA NOUVELLE DIRECTION DE DESCENTE

IF ($\Delta\alpha_i^n \leq 0$) THEN (i-ème terme)

$\mathbf{Vect}(\alpha_i) = 1$

$\Delta\alpha_i^n = 0$ (projection de l'incrément d'endommagement)

ENDIF

DEBUT BOUCLE SUR LES ELEMENTS

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{K_{uu}}(\boldsymbol{\alpha}^- + \Delta\boldsymbol{\alpha}^{\mathbf{n}}) & 0 \\ 0 & \mathbf{K_{\alpha\alpha}}(\mathbf{u}^- + \Delta\mathbf{u}^{\mathbf{n}}) \end{bmatrix}, \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \mathbf{F_u} \\ \mathbf{F_\alpha} \end{pmatrix}$$

IF ($\Delta\alpha_i^n = 0$) THEN

$\mathbf{K}^{\mathbf{n}}_{(\alpha_i,\alpha_k)} = \delta_{i,k}$ (nécessaire pour l'inversion dans la résolution)

ENDIF

FIN BOUCLE SUR LES ELEMENTS

ASSEMBLAGE DE LA MATRICE GLOBALE ET DU VECTEUR RESIDU

IF ($\mathbf{Vect}(\alpha_i) \# 0$) THEN

IF ($\mathbf{F}^{\mathbf{n}}_{\alpha_i} \geq 0$) THEN (l'endommagement cherche encore à diminuer)

$\mathbf{F}^{\mathbf{n}}_{\alpha_i} = 0$ (Afin de converger, comme $\dot{\alpha}_i = 0$)

ELSE (il faut laisser l'endommagement évoluer)

ENDIF

ENDIF

RESOLUTION

IF (RESIDU < CRITERE) THEN (on a convergé, fin du pas de temps)

$\mathbf{u}^- = \mathbf{u}^- + \Delta\mathbf{u}^{\mathbf{n}}$

$\boldsymbol{\alpha}^- = \boldsymbol{\alpha}^- + \Delta\boldsymbol{\alpha}^{\mathbf{n}}$

ELSE (on calcule les incréments pour l'itération suivante)

n = n +1, $\Delta\mathbf{u}^{\mathbf{n}} = \Delta\mathbf{u}^{\mathbf{n-1}} + \delta\mathbf{u}^{\mathbf{n-1}}$

$\Delta\boldsymbol{\alpha}^{\mathbf{n}} = \Delta\boldsymbol{\alpha}^{\mathbf{n-1}} + \delta\boldsymbol{\alpha}^{\mathbf{n-1}}$

ENDIF

4 Modélisations disponibles

Ces différents éléments sont utilisés dans trois types de modélisations :

Calcul 2D en déformations planes : D_PLAN_GVNO
Calcul 2D en axisymétrique : AXIS_GVNO
Calcul 3D : 3D_GVNO

Le mode contraintes planes n'est pas encore disponible.

5 Lois de comportement disponibles avec les modélisations GVNO

La loi de comportement actuellement disponible dans la version non locale à gradient d'endommagement nodal est la suivante :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

ENDO_CARRE	Loi de comportement d'endommagement régularisée quadratique ENDO_CARRE (cf [R5.03.26])

6 Conseils/Procédure pour la mise en oeuvre d'une nouvelle loi de comportement à gradients d'endommagement

L'ajout d'une nouvelle loi de comportement est très simple. Il suffit juste de renseigner les dérivées premières et secondes calculées localement et indépendamment de la partie en gradient qui est gérée de façon générique.

7 Conseils sur l'utilisation de GVNO

Il est préférable d'utiliser la modélisation GVNO avec la méthode de Newton traditionnelle dans le cas de calculs d'endommagement qui ne présentent pas de fortes instabilités (snap-back). En effet, la méthode de Newton est plus rapide mais elle ne permet pas franchir les snap-backs sans l'utilisation d'un algorithme supplémentaire, type pilotage, qui n'a pas encore été développé ici. Dans le cas contraire, il est préférable d'utiliser la méthode « sécante », en déclenchant un PAS_MINI_ELAS suffisamment grand pour s'assurer que l'on vérifie la condition à chaque pas de temps. Cette méthode permettant de franchir les instabilités et donc de toujours converger vers une solution. Toutefois, le nombre d'itérations nécessaires à la convergence peuvent être assez important (ex : 800 itérations). Il faut donc autoriser un nombre maximal d'itérations important dans le fichier de commande (1200 environ). La rapidité de la convergence dépend de la loi utilisée et également de la discrétisation temporelle. Des pas de temps trop grands peuvent conduire à une bien trop difficile convergence. Cette méthode est très efficace pour les lois de comportement quadratiques en endommagement et en déplacements puisque l'on travaille alors avec un algorithme de minimisation alternée robuste.

8 Fonctionnalités et vérifications

Inventaire des tests en support au développement :

Cas test	Description
SSNP307a	test de D_PLAN_GVNO (cf [V6.03.307])
SSNA119a	test de AXIS_GVNO (cf [V6.01.119])
SSNV220a	test de 3D_GVNO (cf [V6.04.220])

9 Bibliographie

[1] LORENTZ E. : "Lois de comportement à gradients de variables internes : construction, formulation variationnelle et mise en œuvre numérique", Thèse de doctorat de l'université Paris 6, 27 avril 1999.

[2] HALPHEN B., NGUYEN Q. S. : "Sur le matériaux standards généralisés", Journal de Mécanique, Vol. 14, N° 1, 1975.

10 Description des versions du document

Version Aster	Auteur(s) Organisme(s)	Description des modifications

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

10.	J.BEAURAIN, K.KAZYMYRENKO EDF-R&D/AMA	Texte initial

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)